

Techniques d'interaction fluide-structure et théories cinétiques pour la simulation des procédés de mélange des polymères

Rudy Valette^{*}, Julien Bruchon, Hugues Dignonnet, Patrice Laure, Mathilde Leboeuf,
Luisa Silva, Bruno Vergnes, Thierry Coupez

Centre de Mise Forme des Matériaux, Ecole Nationale
Supérieure des Mines de Paris, UMR CNRS 7635, BP 207, Sophia Antipolis cedex, France
^{*}rudy.valette@ensmp.fr

Résumé :

Nous présentons une méthode d'interaction fluide-structure basée sur une approche monolithique eulérienne permettant d'étudier à différentes échelles les procédés de mélange sous leur aspect dispersif et distributif. Une approche macroscopique traitant de la résolution mécanique dans le procédé, où interviennent des outils tournants, est présentée, couplée à un modèle dispersif via une théorie cinétique.

Abstract :

A fluid-structure interaction method, based on a eulerian monolithic approach is introduced to study mixing processes within a multiscale approach. One investigates macroscopic flow resolution for the whole process, including moving tools, coupled through a kinetic theory for dispersive mixing.

Mots-clefs :

Eléments finis, interaction fluide-structure, procédés de mélange

1 Introduction

On présente une méthode de calcul numérique d'interactions fluide-structure que l'on applique à l'étude des procédés de mélange dans les polymères fondus. L'approche proposée repose sur une méthode de calcul des champs de vitesse et pression macroscopiques du fluide induits par le mouvement d'outils mélangeurs. Cette méthode, de type monolithique, utilise les éléments finis associés à une formulation multi-domaines.

2 L'approche multi-domaines par maillage du domaine total

Dans le problème à traiter existent a priori deux sous-problèmes couplés : la résolution de l'écoulement sur le domaine fluide variable et la dynamique d'objets solides plongés dans le fluide. Dans la méthode employée, le problème faible à résoudre est étendu du domaine fluide au domaine total, en prolongeant le champ de vitesse au domaine solide. Un problème fluide est ainsi résolu sur tout le domaine « fictif » fluide-solide. Glowinski *et al.* (2000) furent les premiers à utiliser cette technique. De cette manière, la condition de rigidité des solides n'est plus explicite et il convient de la rajouter dans la formulation faible. L'intérêt des méthodes par domaine fictif est que le calcul du champ de vitesse eulérien se fait sur le domaine total, qui a une géométrie a priori simple et qui est fixe. Dans cette approche, la stratégie numérique va être induite par la manière de résoudre les problèmes suivants présentés dans la suite : représentation du domaine solide, le calcul du champ de vitesse, le déplacement du domaine solide.

3 Caractérisation des domaines fluide et solide

Dans la suite, le domaine de calcul Ω est décomposé en deux sous domaines, Ω_f et Ω_s , associés respectivement à la partie fluide et solide. La formulation variationnelle faisant intervenir des

intégrales sur tout le domaine de calcul, et pour différentier les deux domaines dans le calcul de ces intégrales, on introduit des fonctions caractéristiques I_j , $j \in \{f, s\}$ associées à chaque domaine, Ω_j , $j \in \{f, s\}$, avec :

$$I_j(x, t) = 1, \text{ si } x \in \Omega_j \text{ et } I_j(x, t) = 0 \text{ si } x \notin \Omega_j \quad (1)$$

On considérera dans la suite la fonction caractéristique I_s associée au seul domaine solide pour simplifier les notations. L'approximation de la fonction caractéristique adoptée dans ce travail utilise la méthode level set.

3.1 La fonction distance ou level set

La fonction caractéristique définie par (1) est approximée par l'intermédiaire d'une fonction régulière d'approximation d'ordre P1. Le principe est de définir une fonction distance signée dans le domaine de calcul dont l'isovaleur zéro est l'interface que l'on cherche à déterminer. Cette fonction est choisie positive à l'intérieur d'un sous-domaine et négative partout ailleurs. Si l'interface du domaine solide est donnée par une courbe Γ_s , on définit la fonction level set α par :

$$\begin{cases} \alpha(x) = \|x - \Gamma_s\| \text{ dans } \Omega_s \\ \alpha(x) = -\|x - \Gamma_s\| \text{ dans } \Omega_f \end{cases}$$

Pour donner une approximation P1 de cette fonction, il suffit de l'évaluer aux noeuds du maillage. Une approximation P1 de la fonction caractéristique s'obtient alors simplement en évaluant le signe de $\alpha^h(x_i)$ aux noeuds x_i du maillage :

$$I_s^h(x_i) = \begin{cases} 1 \text{ si } \alpha^h(x_i) > 0 \\ 0 \text{ si } \alpha^h(x_i) < 0 \end{cases}$$

Finalement, une approximation P0 de la fonction caractéristique à partir de la fonction distance α peut être approximée par :

$$I_s^h|_K = \frac{\alpha_K^+}{|\alpha|_K}$$

où α_K^+ est la somme des α positifs aux noeuds de l'élément K et $|\alpha|_K$ est la somme des valeurs absolues de α . Cette fonction caractéristique intervient dans les relations de mélange qui donnent les valeurs de viscosité et de densité sur tout le maillage, comme décrit en section 4.

3.2 Calcul de distance à des objets complexes

Le calcul de la fonction distance α à des objets de formes complexes tels que des éléments mélangeurs présentés à la figure 1 nécessite un traitement particulier. En effet, dans la phase de pré-calcul, la surface Γ_s de ces objets complexes n'est pas définie, dans le cas général, par une formule analytique mais par une représentation approchée, telle qu'une triangulation STL (stéréolithographique) générée par des logiciels de conception assistée par ordinateur.

Le calcul de la fonction distance d'un point x du maillage à la surface de l'objet revient alors à un calcul du minimum des distances de ce point à chaque triangle de la surface. La recherche de la distance minimale est accélérée par un pré-partitionnement hiérarchique, sous forme d'octree, de l'espace occupé par le maillage triangulé dans le maillage de calcul. Les détails du calcul et de l'algorithme sont donnés dans Schneider et Eberly (2002).

4 Résolution du problème en vitesse - pression

Dans la formulation multi-domaine, les équations décrivant le comportement du fluide s'écrivent, pour un fluide qu'on choisit ici newtonien pour simplifier les notations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_f \left(\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \vec{u} \cdot \nabla \vec{u} \right) = \rho_f \vec{g} + \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} \\ \nabla \cdot \vec{u} = 0 \\ \underline{\underline{\sigma}} = -pI + 2\eta_f \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) \\ \llbracket \vec{u} \rrbracket_{\Gamma_s} = 0 \\ \llbracket \underline{\underline{\sigma}} \cdot \vec{n} \rrbracket_{\Gamma_s} = 0 \\ \vec{u} = \vec{u}_\Gamma \text{ sur la frontière extérieure } \Gamma \end{array} \right.$$

où u est la vitesse, p la pression, η_f la viscosité du fluide, ρ_f sa densité et $\llbracket . \rrbracket_{\Gamma_s}$ le saut de ' \cdot ' à travers l'interface fluide-solide Γ_s . Patankar *et al.* (2002) ont proposé d'étendre les équations de Navier-Stokes au domaine solide à l'aide de multiplicateurs de Lagrange, en utilisant la condition de rigidité $\varepsilon(u)=0$ sur Ω_s . On peut ainsi exprimer que, dans le domaine solide Ω_s , le mouvement est celui d'un fluide soumis à une contrainte additionnelle de rigidité. Cela revient à chercher un tenseur des contraintes σ dans le solide sous la forme :

$$\underline{\underline{\sigma}} = -pI + 2\eta_s \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) + \underline{\underline{\tau}}$$

sous la contrainte de mouvement de corps rigide $\varepsilon(u)=0$ dont η_s est un facteur de pénalisation et à laquelle le tenseur symétrique τ est le multiplicateur de Lagrange associé. Il a cependant été montré par Laure *et al.* (2005) que le calcul du multiplicateur de Lagrange n'améliore la précision du calcul que dans le cas de maillages très fins, en pratique peu utilisés en 3D, dès qu'un facteur de pénalisation η_s de l'ordre de $10^3 \eta_f$ est utilisé. Par conséquent, la méthode proposée par Patankar *et al.* (2002) est ramenée à une méthode par pénalisation, décrite en 4.1.

4.1 Formulation variationnelle du système fluide solide

Sous l'hypothèse de conditions aux limites de Dirichlet sur les parois extérieures, le problème variationnel sur tout le domaine de calcul Ω s'écrit alors :

$$\begin{aligned} & \text{Trouver } (\vec{u}, p) \text{ tel que } \forall (\vec{v}, q) \in H_0^1(\Omega) \times L^2(\Omega) : \\ & \left\{ \begin{array}{l} \int_{\Omega} 2\eta(I_s) \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}) d\Omega - \int_{\Omega} p \nabla \cdot \vec{v} d\Omega + \int_{\Omega} \rho(I_s) \left(\frac{d\vec{u}}{dt} - \vec{g} \right) \cdot \vec{v} d\Omega = 0 \\ \int_{\Omega} q \nabla \cdot \vec{u} d\Omega = 0 \end{array} \right. \end{aligned}$$

où ρ et η sont définis sur tout le domaine par une loi de mélange :

$$\rho(I_s) = I_s \rho_s + (1 - I_s) \rho_f ; \eta(I_s) = I_s \eta_s + (1 - I_s) \eta_f$$

4.2 Formulation discrète et algorithme utilisé

Pour résoudre le problème non-linéaire et l'intégration en temps, on a recours à un schéma en temps implicite et à une méthode de Newton dont l'algorithme est décrit par :

A chaque pas de temps t_n , opérer :

Initialisation par les valeurs obtenues au pas de temps précédent :

$$\vec{u}_h^0 = \vec{u}_h(t_{n-1}) ; p_h^0 = p_h(t_{n-1}) ; \vec{u}_h^* = \vec{u}_h(t_{n-1})$$

A l'étape k , calcul de \vec{u}_h^k et p_h^k en résolvant le système :

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\rho \frac{\vec{u}_h^k}{\Delta t}, \vec{v}_h \right) + \left(\rho \vec{u}_h^k \cdot \vec{u}_h^{k-1}, \vec{v}_h \right) + 2 \left(\eta \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{u}_h^k) : \underline{\underline{\dot{\epsilon}}}(\vec{v}_h) \right) - \left(p_h^k, \nabla \cdot \vec{v}_h \right) = \\ \left(\rho \vec{g}, \vec{v}_h \right) + \left(\rho \frac{\vec{u}_h^*}{\Delta t}, \vec{v}_h \right) + \left(\rho \vec{u}_h^{k-1} \cdot \vec{u}_h^{k-1}, \vec{v}_h \right) \\ \left(\nabla \cdot \vec{u}_h^k, q_h \right) = 0 \end{array} \right.$$

Test d'arrêt $\|\vec{u}_h^{k-1} - \vec{u}_h^k\| < \varepsilon_1$ de la boucle sur k.

La résolution du problème utilise ici l'élément mixte P1+/P1, dans lequel la vitesse et la pression sont interpolées linéairement, et une fonction bulle est ajoutée pour enrichir l'espace fonctionnel en vitesse et ainsi vérifier la condition inf-sup (Basset, 2006). Chaque problème linéaire de l'étape k est résolu par une méthode de résidu conjugué associée à un pré-conditionneur ILU de la bibliothèque parallèle PETSC (Portable, Extensible Toolkit for Scientific Computation). La stratégie parallèle employée, détaillée dans Dignonnet et Coupez (2003), est de type maître-esclave par modules SPMD (single program, multiple data) et utilise le standard de la bibliothèque MPI (Message Passing Interface).

5 Transport des domaines solides

A l'issue de la résolution du problème discret, le calcul des nouvelles positions des domaines solides est requis avant l'itération suivante du schéma temporel. Dans le cas de la résolution macroscopique d'un procédé de mélange, la position des outils mobiles peut être déterminée explicitement, connaissant leur vitesse de rotation. La procédure décrite en 3.2. est alors effectuée systématiquement à chaque pas de temps.

6 Applications

Un exemple d'application aux procédés de mélange des méthodes développées est présenté, il s'agit du calcul mécanique dans un mélangeur interne, puis d'une application dans laquelle une loi cinétique de dispersion est introduite dans le calcul macroscopique.

La figure 1-gauche montre l'isosurface à zéro de la fonction distance des rotors d'un mélangeur interne immergés dans le maillage de calcul. Dans ce cas, les conditions de mouvement de rotation sur les objets solides sont imposées aux limites du domaine mais aussi dans l'ensemble des nœuds du maillage de calcul appartenant aux éléments intérieurs aux rotors, dans le but de libérer le calcul d'un grand nombre de degrés de libertés. La distance entre les deux axes de rotation des rotors vaut 43 mm, leur vitesse de rotation vaut respectivement 1,2 trs/s et 1,8 trs/s (les deux rotors tournent en sens opposé) et la viscosité du fluide vaut 100 Pa.s.

Les figures 1-centre et -droite montrent respectivement le champ de pression obtenu sur les surfaces des rotors et une carte des taux de cisaillement obtenus dans deux plans de coupe perpendiculaires du domaine fluide. On constate sur la figure 1-centre que la pression est maximale en amont de la pale et minimale après son passage. Elle est plus forte lorsque la pale est proche de la paroi et est également plus importante sur le rotor de gauche, qui a la vitesse la plus élevée. Ceci est confirmé sur la figure 1-droite, qui montre que les taux de cisaillement sont maxima dans les entrefers au-dessus des pales, et plus forts à gauche qu'à droite. La zone centrale, où la distance entre les deux rotors est importante, est le siège de taux de cisaillements plutôt faibles.

On peut également caractériser au cours du temps l'évolution du mélange dispersif. Pour cela, on considère que chacune des charges (sous formes d'agglomérats) initiales a un rayon de

50 μm et est constituée de particules élémentaires de rayon 2 μm . On considère uniquement un mécanisme d'érosion, arrachant aux agglomérats des particules élémentaires, contrôlé par l'équation :

$$\frac{dr}{dt} = -\frac{K\dot{\gamma}}{r^2} \quad (2)$$

qui a été déterminée numériquement dans Leboeuf *et al.* (2007) et expérimentalement dans Kao et Mason (1975) et Collin et Peuvrel-Disidier (2005). On utilise une technique de lâcher de 2000 particules dans l'écoulement macroscopique. A chaque pas de temps (ici de 0,01 s), on calcule par déplacement lagrangien les nouvelles positions des particules, ainsi qu'une interpolation du champ de taux de cisaillement à leur position, afin de calculer l'évolution de leur rayon grâce à l'équation (2).

La figure 2 montre les positions respectives des particules introduites, pour différents temps au cours de la rotation des rotors. Les différentes tailles d'agglomérats sont regroupées en 25 classes, allant de 2 à 50 μm . Au départ, tous les agglomérats sont dans la classe 50 μm (Fig. 3-gauche). Ensuite, au cours du temps, cette classe diminue, au profit de classes de tailles plus faibles (30 à 45 μm), mais surtout de la classe 2 μm , qui recueille toutes les particules érodées. La figure 9 montre les histogrammes de densité massique de distribution de rayons de particules à différents instants, c'est-à-dire l'efficacité du mélange dispersif. Dans ce calcul, le coefficient K a été pris arbitrairement à 2 μm^3 .

7. Conclusion

Une approche par les techniques d'interaction fluide-structure a permis de simuler différents phénomènes mécaniques intervenant dans un mélangeur interne. A l'échelle macroscopique du procédé, il est ainsi possible de prédire, par des techniques rapides, robustes et sans remaillage, les champs de vitesse-pression dans un mélangeur interne et par des techniques de lâcher de particules couplées à un modèle cinétique, caractériser la qualité de mélanges dispersif et distributif dans une géométrie complexe.

Références

- R. Glowinski, T.-W. Pan, T. Helsa, D. Joseph, J. Periaux, A fictitious domain approach to the direct numerical simulation of incompressible viscous flow past moving rigid bodies : Application to particulate flow. *J. Comput. Phys.* 169 (2000), 363.
- P Schneider, D. Eberly, Geometric Tools for Computer Graphics, *Morgan Kaufmann series in Computer Graphics*, San Francisco, 2002.
- N. Patankar, , P. Singh, D. Joseph, R. Glowinski, T.-W. Pan, A new formulation of the distributed Lagrange multiplier/fictitious domain method for particulate flows. *Int. J. Multiphase Flows* 26 (2000), 1509– 1524.
- P. Laure, G. Beaume, O. Basset ; L. Silva, T. Coupez, Les méthodes numériques pour les écoulements de fluides chargés, Proc. 1^{er} Colloque du GDR Interactions Fluide-Structure (2005).
- O. Basset, *Simulation numérique d'écoulement de fluides hétérogènes sur grille de calcul*. PhD thesis, Ecole Nationale Supérieure des Mines de Paris, Paris, 2006.
- H. Dignonnet, T. Coupez, Object-oriented programming for "fast-and-easy" development of parallel applications in forming processes simulation. In K.J. Bathe, editor, Second MIT Conference on Computational Fluid and Solid Mechanics, (2003) 1922–1924.
- M. Leboeuf, T. Coupez, N. Ghamri, B. Brulé, B. Vergnes, Simulation directe 2D et 3D de la dispersion d'agglomérats sous cisaillement dans une matrice polymère, Proc. 18^{ème} Congrès Français de Mécanique, 2007.

S. V. Kao, S. G. Mason, Dispersion of particles by shear, *Nature* 253 (1975) 619.
 V. Collin, E. Peuvrel-Disidier, Dispersion mechanisms of carbon black in an elastomer matrix, *Elastomery*, vol. 9 (2005) 9-15.

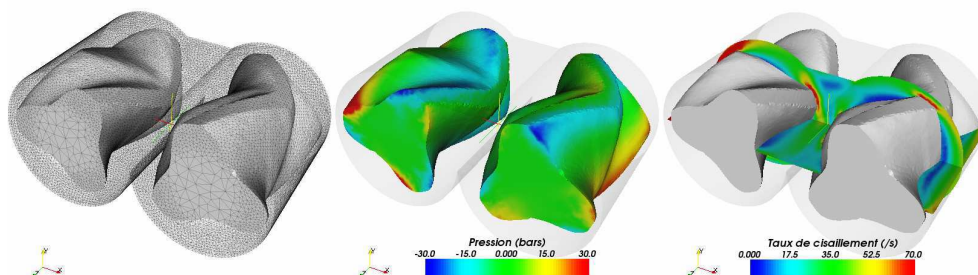


FIG. 1 – Représentation, dans le maillage de calcul, de la surface des rotors d'un mélangeur interne par isoaleur à zéro de la fonction *level set* de chaque domaine solide représentant un rotor (gauche), carte du champ de pression (centre) et des taux de cisaillement (droite) calculés.

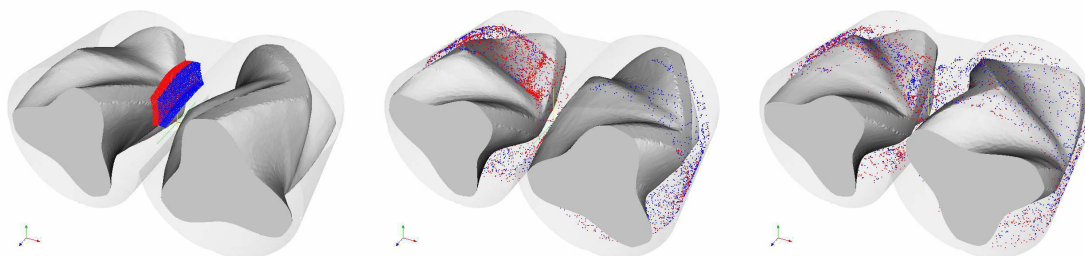


FIG. 2 – Calcul du lâcher d'un ensemble de 2000 particules dans un mélangeur interne. Etat de distribution après 0 s (gauche), 2 s (centre) et 4 s (droite).

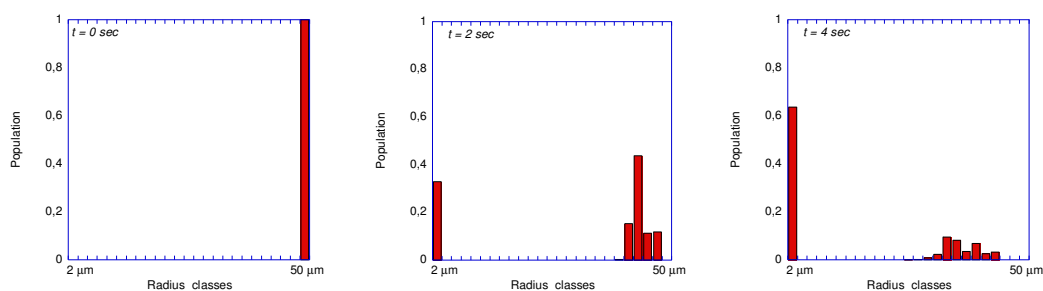


FIG. 3 – Histogrammes de densité massique de distribution de rayons de particules pour les classes comprises entre 2 μm et 50 μm à différents instants : $t = 0$ s, 2 s et 4 s.